

ADIMAT, ASISTENTE DE DIAGRAMAS DE FASES PARA INGENIEROS DE MATERIALES

ESCLAPÉS JOVER, Fco. Javier⁽¹⁾; LLORENS NICOLAU, Mercedes⁽²⁾

⁽¹⁾Universidad de Alicante, España
Dpto. de Expresión Gráfica y Cartografía
e-mail: javier.esclapes@ua.es

⁽²⁾Ingenio, ingeniería, materiales y diseño industrial, España
Responsable de proyectos
e-mail: mllorens@ingenioproyectos.com

RESUMEN

ADIMAT es un método gráfico que ayuda a entender los mecanismos de solubilidad, transformación, endurecimiento y equilibrio de fases, y trasladarlos a la utilización real de los mismos en la industria (tratamientos, procesos, modificación de propiedades,...). Basa su funcionamiento en la recogida, cálculo, representación y análisis de puntos significativos (como temperaturas de fusión, temperaturas de cambios alotrópicos, puntos de transformación de fases,...) para representar los diagramas de fases, dentro del equilibrio.

Concretamente, resuelve sistemas de materiales con transformaciones del tipo eutéctico, peritéctico y eutectoide (endurecimiento por precipitación durante la solidificación), las tres reacciones más importantes dada su aparición en distintos sistemas de materiales. Entre todas las transformaciones que pueden ocurrir, como sabemos, éstas son las más importantes por su utilización en procesos y tratamientos industriales.

El objetivo principal del programa ADIMAT es servir de apoyo al alumno en el estudio (el alumno vincula teoría y práctica a través de un software específico), sin olvidar que se está formando un profesional, el cual, en un futuro muy próximo podría llegar a hacer uso del programa de nuevo, ya sea en el campo de la investigación o en el sector industrial.

Palabras clave: aplicación informática, solubilidad, equilibrio de fases, tratamientos industriales, transformación, eutéctica, peritéctica y eutectoide.

ABSTRACT

ADIMAT is a graphical method for helping users to understand the mechanisms of solubility, transformation, hardening and phase equilibrium and to apply them in industry (treatments, processes, modification of properties, and so on) It focuses on gathering, calculating, depicting and analysing significant data points (such as fusion temperatures, allotropic transition temperatures, phase transformation points, and so on) in order to depict phase diagrams within the equilibrium.

Specifically, it resolves materials systems with eutectic, peritectic and eutectoid transformations (hardening by means of precipitation during the solidification process). These are the three most important reactions since they occur in various different materials systems. Of all the transformations that can occur, these, as we know, are the most important as far as usage in industrial processes and treatments is concerned.

The primary objective of the ADIMAT program is to support study (allowing the student to link theory and practice by means of specific software) without forgetting that the student is being trained as a professional who, in the very near future, might have use of the system again, whether it be for research or within the framework of the industrial sector.

Key words: software, solubility, equilibrium of phases, industrial processing, transformation, eutectic, peritectic and eutectoid.

1. Introducción

Con la generación de este proyecto final de carrera se ha respondido a la necesidad planteada al inicio del mismo.

El alumno precisaba de un método gráfico más allá de las transparencias, fotocopias,... y del método tradicional magistral. La aplicación ADIMAT pretende salvar este obstáculo presentándose como una alternativa en la que el alumno vincula teoría y práctica a través de un software específico.

ADIMAT es un método gráfico que ayuda a entender los mecanismos de solubilidad, transformación, endurecimiento y equilibrio de fases, y trasladarlos a la utilización real de los mismos en la industria (tratamientos, procesos, modificación de propiedades,...). ADIMAT se define como “el Asistente que permite la realización y análisis de Diagramas de Fases en Equilibrio a Ingenieros de Materiales y otros estudiantes o profesionales relacionados con la Ciencia e Ingeniería de los Materiales” (en la siguiente imagen se presenta la ventana de bienvenida de la aplicación, figura 1).



Figura 1: Capturación de la ventana de inicio o bienvenida a la aplicación

2. Fundamentos de la aplicación ADIMAT

ADIMAT basa su funcionamiento en la recogida, cálculo, representación y análisis de puntos significativos (como temperaturas de fusión, temperaturas de cambios alotrópicos, puntos de transformación de fases,...) para representar los diagramas de fases, dentro del equilibrio.

Como sabemos, dependiendo de la forma en la que solidifican los sistemas de materiales, podemos obtener como resultado a las transformaciones acontecidas distintos diagramas de fases.

La aplicación ADIMAT desarrolla y analiza diagramas de fases en equilibrio a partir de la documentación científica conocida.

Concretamente, resuelve sistemas de materiales con transformaciones del tipo eutéctico, peritético y eutectoide (endurecimiento por precipitación durante la solidificación), las tres reacciones más importantes dada su aparición en distintos sistemas de materiales. Entre todas las transformaciones que pueden ocurrir, como sabemos, éstas son las más importantes por su utilización en procesos y tratamientos industriales.

A continuación, se adjuntan tres posibles casos de estudio y resolución con la aplicación ADIMAT (figuras de la 2 a la 4). Tras introducir los datos necesarios para la resolución del diagrama de fases en equilibrio, el programa devuelve una gráfica representativa para un sistema A-B modelo, en el cual identifica las diferentes fases generadas en función de porcentajes, transformaciones y temperaturas. Si se desea, ADIMAT puede profundizar sobre cada uno de los diagramas obtenidos, analizando posibles microestructuras generadas.

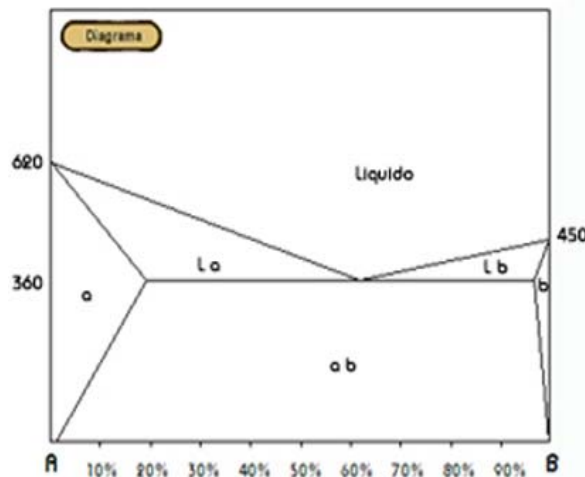


Figura 2: Diagrama hipotético con eutéctica. Sistema sencillo en el que se produce una reacción $L \rightleftharpoons S_1 + S_2$ (obtenido con la aplicación ADIMAT). Diagrama en función de temperaturas y porcentajes de mezcla A-B que intervienen.

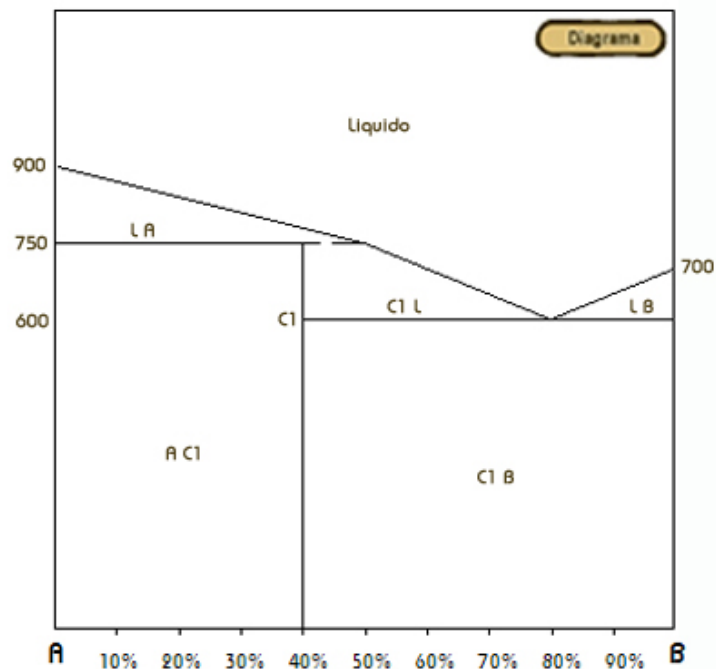


Figura 3: Diagrama hipotético con peritética. Distinguimos dos reacciones en el sistema A-B representado, en primer lugar, una reacción $L + S_1 \rightleftharpoons S_2$ (peritética) al 40% de componente B, y otra reacción, en este caso, eutéctica al 79,9% de B. (Diagrama obtenido a través de la aplicación ADIMAT.)

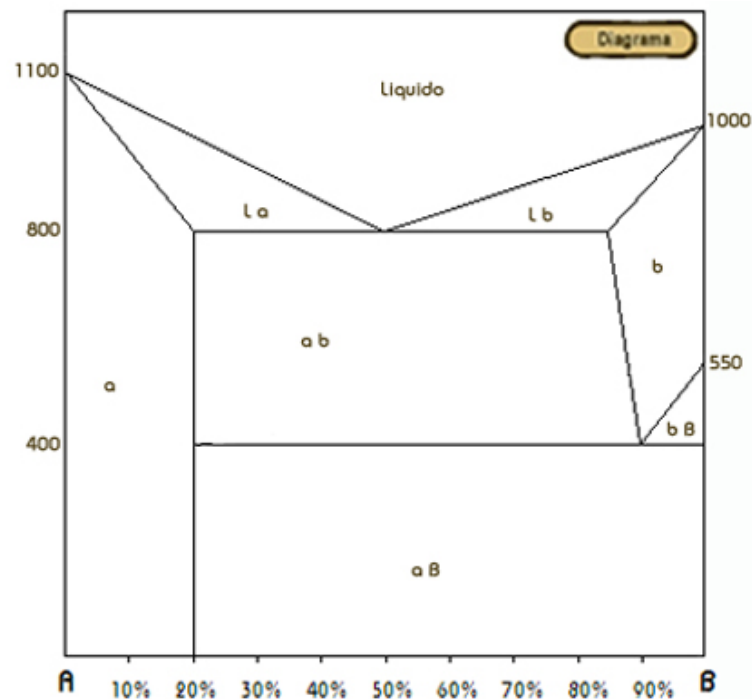


Figura 4: Diagrama hipotético con eutectoide. En este caso el sistema A-B es más complejo, con más reacciones. De ellas, destaca una reacción de tipo eutectoide, es decir, $S_1 \rightleftharpoons S_2 + S_3$ al 50% del componente B (Diagrama obtenido con la aplicación ADIMAT.)

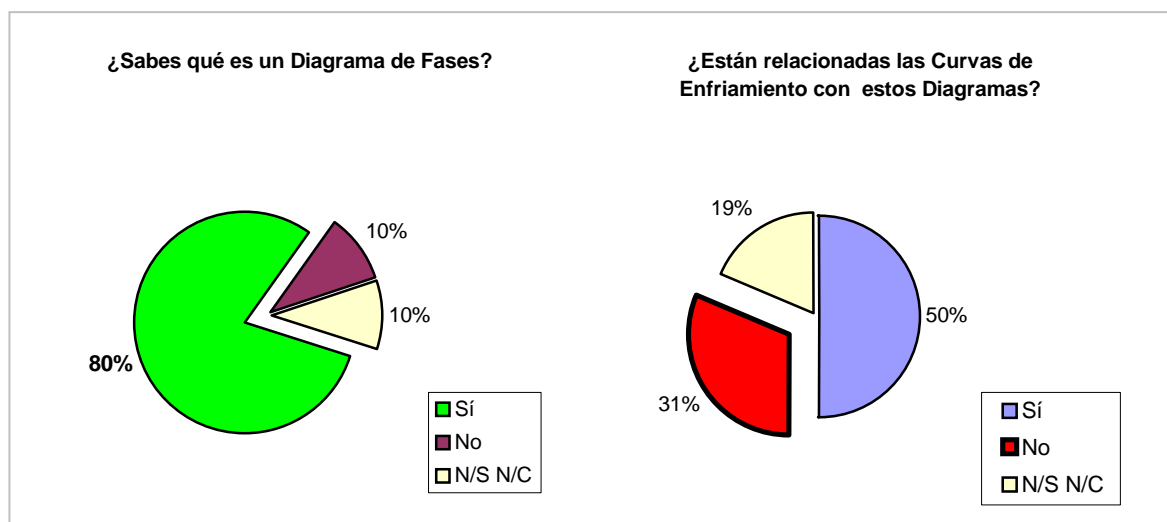
3. Aplicación con carácter didáctico

Lógicamente, el alumno de ingeniería no muestra inconvenientes al abordar el estudio de sistemas con solubilidad total ilimitada (solubilidad total en estado líquido y sólido), representados a través de diagramas de fases isomorfos; lo que es cierto es que sus problemas aumentan al abordar aspectos de endurecimiento por precipitación en la solidificación, con lo cual el objetivo principal del programa ADIMAT es servir de apoyo al alumno en el estudio.

No podemos dejar de ver al alumno como un profesional en potencia en un futuro muy próximo, de modo que la perspectiva del programa aumenta en este aspecto, puesto que se dedique al campo de la investigación o al sector industrial, puede que necesite del apoyo del programa en un momento determinado.

Tras un estudio sobre los conocimientos sobre diagramas de fases entre alumnos y antiguos alumnos de distintas escuelas (EPSA-UPV, UPV y CEU), en el 50% de los casos en los que se afirmaba conocer el significado de un diagrama de este tipo (80% de los encuestados totales), no supieron relacionar conceptos básicos de enfriamiento con los diagramas de fases en equilibrio.

De aquí que se entienda que no se profundizó correctamente sobre el tema en cuestión cuando era necesario dentro del programa curricular de la ingeniería cursada (ver ejemplos de gráficos extraídos del estudio realizado, figuras 5 y 6).



Figuras 5 y 6: Gráficos extraídos del estudio estadístico realizado acerca de los conocimientos sobre diagramas de fases y su aplicación posterior en la industria

La aplicación ADIMAT ofrece entonces la posibilidad de relacionar conceptos teóricos de solidificación mientras se representan diagramas de fases en el programa, por lo que, sea el alumno el que está utilizando la aplicación o sea el profesional titulado, uno analizará y relacionará conceptos de forma muy gráfica, sencilla y rápida, mientras que el otro, recordará y relacionará conceptos algo olvidados, quizá necesarios en algún momento de su profesión.

4. Interfaz y funcionamiento de ADIMAT

ADIMAT se presenta ante el usuario demandándole, ventana a ventana, los datos o valores pertinentes para representar los diagramas de fases en equilibrio y analizar la solidificación a temperatura ambiente (a través de las microestructuras que se forman), según esos valores introducidos y el tipo de transformaciones y características de cada sistema de materiales.

Siguiendo los pasos a modo de asistente, el usuario va suministrando los datos oportunos al programa (temperaturas de fusión de los elementos principales, solubilidad a temperatura ambiente, compuestos intermetálicos, cambios alotrópicos y reacciones del sistema), para que este finalmente pueda trazar el diagrama de fases correspondiente y realizar los análisis pertinentes sobre el mismo.

Siempre que lo necesite el usuario puede obtener ayuda desde distintos aspectos:

- Ayuda teórica sobre los datos a introducir y la relación con otros conceptos relacionados con el tema (recordar que el objetivo esencial del programa ADIMAT es que el usuario-alumno comprenda y domine la materia, no se trata de introducir parámetros mecánicamente). Este tipo de ayuda se presenta sobre la propia pantalla en la que se introducen los datos, mientras que la relación entre conceptos con otros apartados del programa se realiza en un módulo aparte, como ventana flotante (figuras 7 y 9).

- Definiciones de cada una de las variables que aparezcan en pantalla con tan sólo posar el puntero del ratón sobre ellas.
- Ayuda propia del programa a nivel de utilización del mismo, a través de ventanas flotantes y mensajes de aviso sobre faltas o errores de ejecución al introducir datos o resolver cualquier problema.

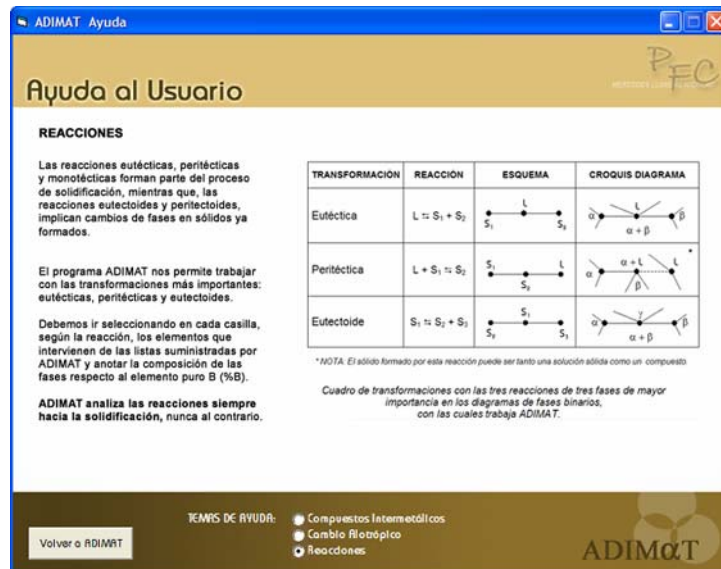


Figura 7: Ventana flotante de ayuda teórica, suministrada por la aplicación ADIMAT

En la siguientes imágenes (figuras 8 y 9), se muestran distintas ventanas de la aplicación, en la que se aprecia el diseño gráfico de las pantallas de la aplicación, así como de la ayuda de la misma. El usuario sabrá en todo momento en qué parte de proceso de introducción y resolución de datos se encuentra dado que el programa presenta un mapa de situación en la zona inferior de cada ventana.



Figuras 8 y 9: Ventana correspondiente al primer paso de la introducción de datos en ADIMAT (izquierda). Cambios producidos en la misma al hacer clic sobre el botón ayuda de la ventana (derecha).

Además, en todo momento tendrá la posibilidad de modificar cualquier dato introducido, de modo que puede ir ajustando el diagrama y el análisis del sistema, dependiendo de cual sea su objetivo final, todo ello de manera muy rápida y totalmente visual (ver imágenes de distintas ventanas del programa en la figura 10).

Junto al programa, se adjunta el Manual del Usuario de ADIMAT [1], base para una instalación y utilización del programa ADIMAT rápida y sencilla, con problemas de distinta complejidad resueltos y fundamentos teóricos de Ciencia e Ingeniería de Materiales sobre los Diagramas de Fases en Equilibrio.

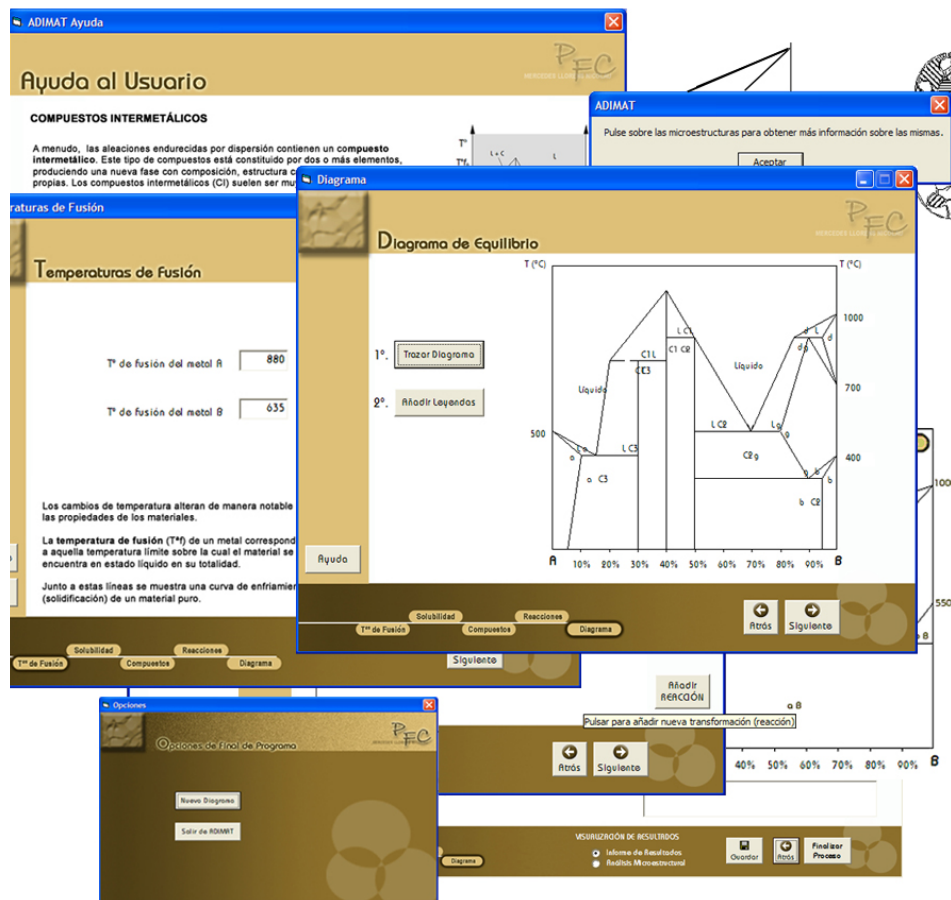


Figura 10: Capturaciones de distintas ventanas de ADIMAT

Al resolver el sistema, según los datos introducidos, y obtener el diagrama correspondiente a los mismos, la aplicación ADIMAT nos ofrece dos posibilidades de análisis y visualización de los resultados.

Una forma de análisis, es la de obtener un Informe de Resultados obtenidos, en el que se listan todas las características, reacciones y transformaciones, cambios alotrópicos... del sistema (figura 11). Otra forma, es obtener un análisis microestructural de las fases a temperatura ambiente a partir del diagrama de fases en equilibrio generado (figura 12).

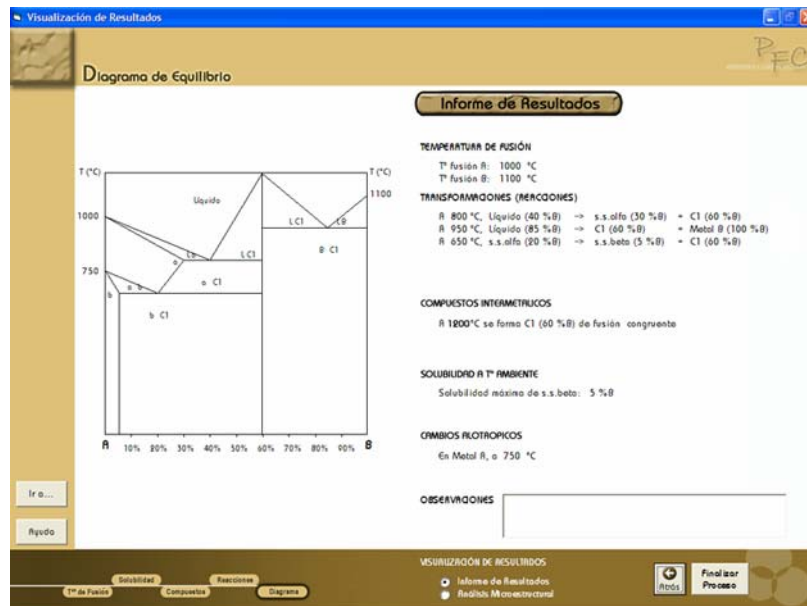


Figura 11: Informe de resultados obtenidos generados a partir de un diagrama de fases en equilibrio en la aplicación ADIMAT. Los datos del ejercicio resuelto con ADIMAT se extrajeron de [2].

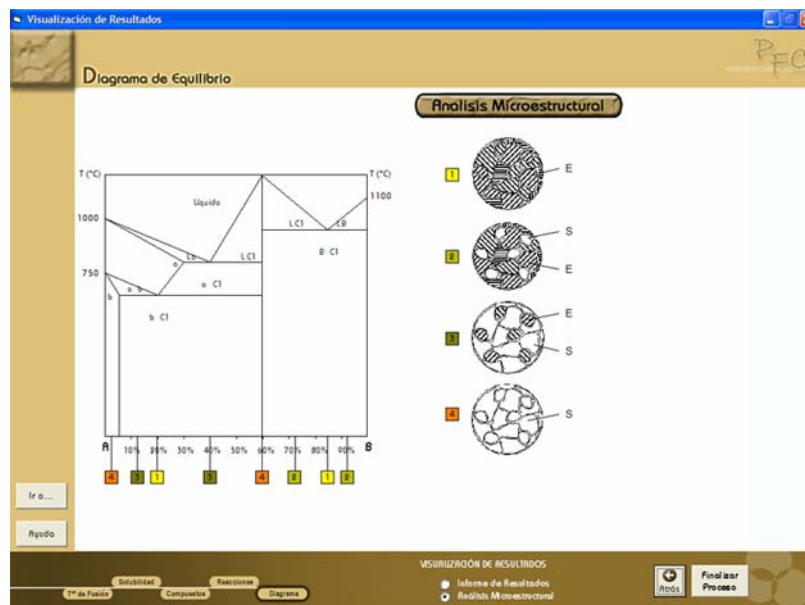


Figura 12: Análisis microestructural a partir de un diagrama de fases en equilibrio en la aplicación ADIMAT.

En esta última, el programa ADIMAT distingue y numera las diferentes formas estructurales que se podrían conseguir asignándoles un color determinado a cada tipo, y distinguiendo tipos de grano (como puede observarse en las figuras 12 y 13). Si se deseara obtener más información a cerca de cada microestructura, tan sólo necesitaríamos hacer clic sobre cada una de ellas.

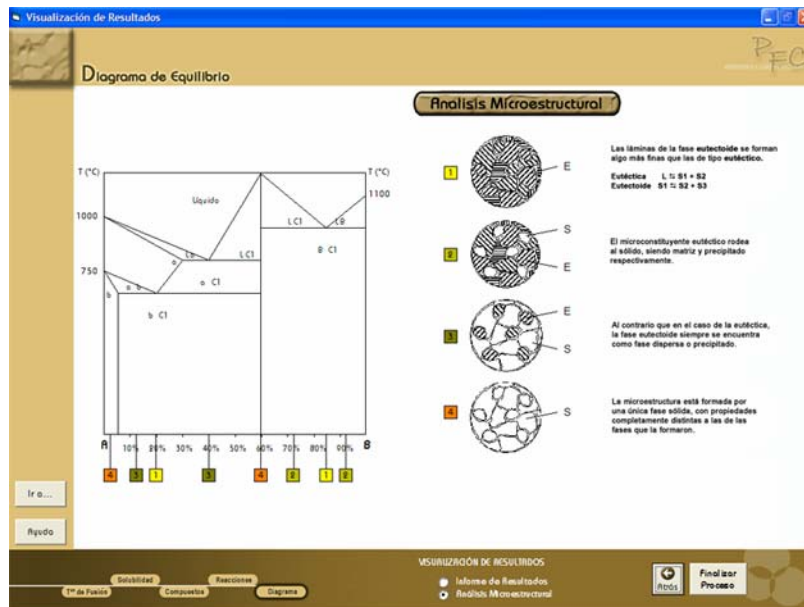


Figura 13: Análisis microestructural ampliado particularmente para cada una de las estructuras obtenidas (programa ADIMAT).

Como se comentaba, en todo momento podremos volver a cualquier parte de la introducción de datos y modificar cualquier dato para recalculer con el programa y observar diferencias entre distintos tipos de diagramas rápidamente.

El programa, además, nos permite guardar el diagrama de fases obtenido en formato de imagen, para posibles comparaciones o estudios posteriores.

Debe destacar, entonces, la base científica del programa, es decir, el objetivo del programa ADIMAT es que el usuario distinga claramente los factores que intervienen en un Diagrama de Fases en Equilibrio, y por supuesto, representar el diagrama y mostrar y analizar resultados (siempre en el mínimo tiempo posible). Para ello es necesario que se dominen los conceptos de estructura de materiales.

Dado que la aplicación representa y analiza diagramas de fases en equilibrio, la programación de la misma parte de esa base científica conocida, amoldando el programa a la aplicación y no de forma inversa.

5. Base científica del programa ADIMAT

Cuando nos disponemos a estudiar qué tipo de aplicación es más apropiada para un material en concreto, debemos tener en cuenta distintos factores [3]: Estructura del material, Propiedades del material y Método de procesado del material.

Si el ingeniero de materiales modifica alguno de estos tres aspectos, los otros dos también cambian, por lo que se debe conseguir aprovechar la relación compleja entre la estructura interna del material, su procesado y las propiedades finales del mismo.

A menudo, como sabemos, cambios estructurales pequeños tienen un efecto profundo sobre las propiedades del material. Por ejemplo, pequeñísimas adiciones de impurezas modifican de forma extraordinaria la conductividad de un semiconductor.

Las propiedades de los materiales pueden verse modificadas por la influencia de elementos agregados a la aleación. Cada elemento puede aportar nuevas propiedades a una aleación, pero, la acción de los elementos de aportación no sólo depende de su naturaleza, sino también de la proporción de elemento o elementos introducida en la aleación.

La introducción de defectos puntuales modifica la composición del material, influyendo sobre el comportamiento durante la solidificación. Este efecto se analiza mediante el diagrama de fases de equilibrio, a partir del cual se podrá predecir cómo se solidificará un material, tanto en condiciones de equilibrio como fuera de éste.

Generalmente, un material se trata térmicamente por debajo de su temperatura de fusión para lograr modificar su estructura interna. Ejemplo de ello, son procesos como la cementación o el nitrurado en los materiales metálicos [4].

El tipo de procesado que se utiliza depende, por lo menos de manera parcial, de las propiedades—y por lo tanto, de la estructura—del material.

Cuando en la aleación sólo hay presentes dos elementos, se puede elaborar un diagrama de fases binario. Pero, como sabemos, no todos los diagramas de fases se estructuran de la misma forma, pues los elementos, las combinaciones de los mismos, factores internos del equilibrio (propiedades mecánicas, estructura,...) y externos (temperatura) son condicionantes del trazado de estos diagramas.

La temperatura, indudablemente, es un efecto ambiental que influye en el comportamiento de los materiales. La relación estructura-propiedades-procesado se ve modificada por el medio ambiente al cual esté sujeto el material.

Lo esperado sería una solidificación (de una aleación) en la que los elementos difundan durante el enfriamiento, a fin de satisfacer el diagrama de fases y producir una estructura de equilibrio uniforme, pero no en todos los diagramas las transformaciones se realizarán de manera tan simple.

Las transformaciones por las que pasan ciertas aleaciones para llegar a la estabilidad solidificados en ocasiones son muy complejas. Incluso, un enfriamiento rápido puede complicar las condiciones de equilibrio y la difusión de los átomos, de manera que, se observa que el tiempo es otro factor importante que interviene en los procesos de solidificación.

No debemos olvidar que los diagramas de fases en equilibrio se configuran a partir de puntos significativos obtenidos del análisis de curvas de enfriamiento y transformación, representadas con la relación Temperatura-tiempo; de manera que, aunque de forma indirecta, el tiempo está presente en el análisis de los diagramas de fases, más aún si nos basamos en el estudio de los mismos para provocar que estos sistemas rompan su equilibrio para obtener materiales con distintas características y propiedades, aplicables mejoras de procesos o nuevos productos [1].

Es aquí donde la importancia del estudio de los Diagramas de Fases en Equilibrio se hace patente, y convirtiéndose la aplicación ADIMAT en una herramienta imprescindible.

6. Conclusiones

Tras resolver con el programa ADIMAT problemas tipo planteados sobre diagramas de fase [2], propuestos para su estudio en distintas asignaturas de estructura de materiales en ingeniería, se plantearon nuevos y se resolvieron, modificando y comparando resultados [1].

Para la realización de la aplicación fue necesario conocer y dominar, en la medida de lo posible, el programa Visual Basic (además de los propios conocimientos de Ciencias e Ingeniería de Materiales). Este programa no es tan sólo un lenguaje [5], es un entorno de desarrollo integrado en que se puede desarrollar, ejecutar, probar y depurar los errores de las aplicaciones. La dificultad que residía dentro de éste, era el total desconocimiento de programación de los autores de la aplicación (ingenieros en la especialidad de materiales, y no informáticos); por lo que el camino hasta el objetivo final se estrechó y dificultó en gran medida.

El programa responde correctamente a los objetivos iniciales, planteados en el proyecto de creación del mismo.

ADIMAT resuelve con facilidad sistemas bifásicos de materiales con transformaciones del tipo eutéctico, peritéctico y eutectoide (endurecimiento por precipitación durante la solidificación), las tres reacciones más importantes por su utilización en procesos y tratamientos industriales; así como, los visualiza, clarifica y analiza con rapidez.

De momento, esta tan sólo es la primera versión de la aplicación ADIMAT, posiblemente, se plantee la probabilidad de mejorar y ampliar las capacidades del programa que hoy por hoy son muy satisfactorias.

Referencias

[1] ESCLAPÉS, Fco. Javier y LLORENS, Mercedes. Proyecto de Estudio y Manual de ADIMAT 1.0, 2005.

[2] SÁNCHEZ, Lourdes y BALART, Rafael. Problemas de fundamentos de ciencia de los materiales. EPSA. SPUPV-99.1581.

[3] LASHERAS, Jose M^a y CARRASQUILLA, Javier F. Ciencia de Materiales. Edit. Donostiarra.

[4] SMITH, William F. Fundamentos de la Ciencia e Ingeniería de Materiales. Edit. McGraw Hill.

[5] PETROUTSOS, Evangelos. La biblia de Visual Basic 5. Editorial Anaya.